統計系配位の深層学習による相転移温度推定

Estimation of phase transition temperature through deep learning of ensemble of statistical system

金沢大学大学院自然科学研究科
数物科学専攻

氏名 藤田 達大

Deep learning has developed in the field of machine learning and artificial intelligence. The technology has been applied in various fields. It is influenced also in the field of physics and various applications are applied regardless of particle physics and condensed matter.

Deep learning has been successful but it is not well understood why it works. But information reduction of deep learning is very similar to the renormalization group. As a deep learning method similar to the renormalization group, there is a method called a convolution neural network used in image recognition. In the previous study, image data was replaced with spin ensemble of the two-dimensional long range ising model, and the phase transition temperature was detected. Although there are similarities in the renormalization group, it remains uncertain why the phase transition temperature is detected.

We design a convolutional neural network and studies estimation of phase transition temperature. Train data is ensemble of statistical system of one-dimensional long range ising model. Our results show that the optimized machine constructs the energy function in the process of estimating temperature from ensemble of statistical system. In other words, machines are learning energy. The weight of the softmax function has information on temperature and bias has information on free energy. Information on phase transition can be judged from the specific heat. The specific heat can be obtained by differentiate the bias to the second order the weight. Therefore, if the temperature is estimated from ensemble of statistical system and the phase transition temperature is detected, it is necessary to judge from the optimized machine based on the information of the specific heat.

深層学習は機械学習（人工知能）の分野で大きく発展している。その技術は様々な分野で注目を集め、物理学の分野でもその影響を受けており、素粒子・物性物理問わず様々な応用がなされている。深層学習は成功は収めているが、なぜ上手くいくか十分に理解されていないところがある。その一方では、深層学習の学習過程は大量の入力データから、重要なデータを残し、不要な情報は捨てることで情報縮約を行っていると考えられる。物理学者にとってどこか見覚えのある光景であり、言い換えると、ミクロな情報から重要なマクロの情報を抽出する「くりこみ群」である。

制限ボルツマンマシンと呼ばれる深層学習の手法とくりこみ群の対応関係を考察している先行研究がある。この手法は、現実の物理量などのデータが入力される可視変数 v_i からなる可視層、モデルの表現能力を向上させる隠れ変数 h_i からなる隠れ層の 2 種類の層がある。これらの層の変数同士はパラメータ ω_{ij} で結合される。この可視変数に対し画素データやスピン配位などを入力データとして与え、パラメータ ω_{ij} を最適化することにより、入力データに対応する確率分布を与える。現実の物理量 v_i からより少ない隠れ変数 h_i への書き換えは、重要な情報の抽出に対応しており、くりこみ群に対応していると考えられる。

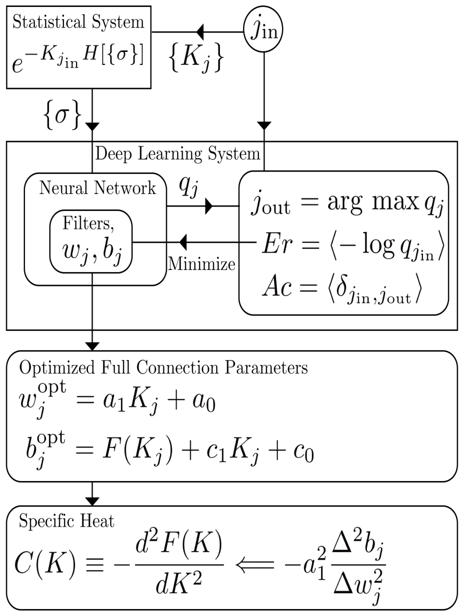

図 1: 概要

他にくりこみ群に類似している深層学習の方法として、画像認識で用いられる畳み込みニューラルネットワーク（CNN）と呼ばれる手法がある。この手法では、画像データなどを入力とし、それを各ブロックに分けてブロックごとに畳み込みという情報縮約を行う。出力側で元の画像データが何であったかを識別する操作を行い、その結果が入力と一致するように畳み込みに用いたパラメータを最適化していく。この手法は情報縮約という点でブロックスピン変換にとても類似しており、畳み込みの操作によって相転移点が推定されると予想される。先行研究では、画像データを 2 次元イジングモデルのスピン配位に置き換え、相転移温度の検出が行われている。ただし機械に教えていることは配位とその温度のみであり、機械はパラメーターに相転移温度および秩序変数の情報を残していると主張している。くりこみ群の類似性はあるが、なぜ相転移温度が検出されるのか疑問が残ったままである。

本論文では深層学習の方法である CNN を用いて統計系の配位を入力データとし温度推定を行い、相転移温度の推定について議論した。結論を述べると最適化された機械は、統計系の配位から温度を推定する過程において機械内部にエネルギー関数を構成している。つまりエネルギーを学んでいる。温度の分類（推定）器であるソフトマックス関数の重みは温度の情報を持ち、バイアスは自由エネルギーの情報を持つ。相転移の情報は比熱の特異性から得られるとすると、バイアスを重みで 2 階差分をとったものである。よって統計系の配位から温度推定を行い、相転移温度を検出したいならば、最適化された機械から比熱の情報で判断する必要がある。この結果は空間次元や

モデルによらない。

本論文の計算実験に用いたモデルは 1 次元長距離イジングモデルである。1 次元長距離イジングモデルのハミルトニアンは以下の通りである。

$$H = -K \sum_n \sum_i \left(\frac{1}{n^p} \right) \sigma_i \sigma_{i+n} \tag{0.0.1}$$

今後の議論では $p = 1.8$、相互作用の長さ n の最大の値は $n_{\max} = 8$ とする。1 次元最近接イジングモデルでは有限温度では相転移は起こらないが、相互作用が最近接ではなく長距離相互作用がある場合は、1 次元でも有限温度で相転移を起きることが知られている。1 次元長距離イジングモデルは厳密なくりこみ群 (BDRG) が可能であり、有限サイズ・有限レンジにおいて分配関数を求めることができる。相転移は熱力学極限を取らなければ、起こり得ないが有限サイズ・有限レンジでも比熱に特異性が残ることが計算でわかる。

まず機械学習に用いたサンプルデータについて説明する。モンテカルロシミュレーションから 1 次元長距離イジングモデルの配位を、$K = 0.2$ から $K = 0.5$ まで 0.02 刻みで生成する。サイズは $N = 2^{10} = 1024$、サンプル数 128000 とする。ただしドメインウォール表示で学習を行った。サンプル数の 80% を訓練データとして使い、残りの 20% をテストデータとして過学習が起きていないか判断させる。

本論文の目的の 1 つとして 1 次元長距離イジングモデルの配位 σ から温度 K を推定する関数 F

$$F : \sigma \to K \tag{0.0.2}$$

を構成することである。本論文で用いた CNN の構造は

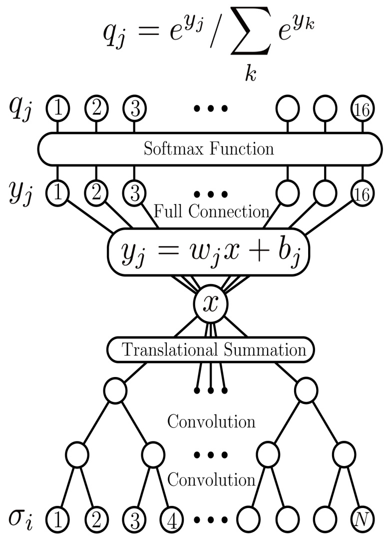

図 2: 機械の構成

$$z_{i,k}^{(l)} \left(\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}, \mathbf{x} \right) = f \left(u_{i,k}^{(l)} \right) \ , \ u_{i,k}^{(l)} = \sum_{p=0}^{H-1} h_{p,k}^{(l)} z_{Si+p,k}^{(l-1)} + b_{i,k}^{(l)} \tag{0.0.3}$$

と記述でき l は層の数であり、$l = 0$ のとき $z_j^{(0)} = x_j$ とした。f は活性化関数であり b はバイアス 、ω は重みと呼ばれる。太字 $\mathbf{W}$、$\mathbf{b}$、$\mathbf{x}$ は成分 ω、b、x を行列で表現したものである。また h はフィルターサイズ H であり、添字 k はチャネル成分を表し S はストライドを表す。サイズ L のデータは畳み込みの操作によってサイズが $(\lfloor \frac{L-H}{S} \rfloor + 1)$ となる。活性化関数は正規線形関数 (ReLU) 関数を用いる。

$$f(x) = \max\{0, x\} = \begin{cases} x & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

モンテカルロのデータ $\{\sigma\}$ は周期境界条件を課しているので、平行移動不変性を持っている。それを考慮するために添字 i, k に対して縮約する。

$$z = \sum_i \sum_k z_{i,k} \tag{0.0.4}$$

縮約された z を用いて、入力データ x のクラス k に属する確率を求める。

$$\begin{aligned} P(C_k|\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}) &= \underset{k}{\mathrm{softmax}}(u_1,u_2,\ldots,u_K) \\ &\equiv \frac{e^{u_k}}{\sum_l e^{u_l}} \ ,\ u_k = \omega_k z + b_k \end{aligned} \tag{0.0.5}$$

最終的に入力データ x が推定する出力 y はソフトマックス関数が最大となる確率つまりもっとらしいクラスを出力とする。

$$y\left(\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}\right) = \arg\max_{C} P(C|\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}) \tag{0.0.6}$$

教師あり学習の場合、出力結果がわかっているので機械学習が推定した値と正解の値が一致するようにパラメータ ω, b を最適化する。これらのパラメータはクロスエントロピーが最小となるように決定する。

$$E(\mathbf{W},\mathbf{b}) = -\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\left\{\delta_{y_n k}\log\left(y\left(\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}_n\right)\right)\right\} \tag{0.0.7}$$

また機械の性能を評価するために正答率 A を

$$A = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta\left(y\left(\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}_n\right),y_n\right) \tag{0.0.8}$$

と定義する。学習結果は正答率は 43.5%であり、クロスエントロピーの値は 1.274 であった。例えばMNIST データを用いて CNN で画像分類を行う場合、正答率は約 99%の精度で求まる。それに比べて正答率 43.5%はかなり悪い精度と言える。統計配位から温度推定する際、正答率がどこまで高い値が求まるか検証を行った。すなわち正答率の理論的上限値を求める。

正答率の理論的上限値を求めるには確率分布を知らないと求めれないので、1 次元長距離イジングモデルの確率分布を求めることを考える。一般的に確率分布を求めることは困難である。しかし BDRG の手法を用いれば自由エネルギーを求めることができ、その結果を用いて平均と分散を求め、正規分布で近似した確率分布を求めることはできる。また制限ボルツマンマシンの学習パラメータは学習によって定めるが、BDRG の方法を用いれば制限ボルツマンマシンのパラメータを決定することができ、くりこみ群とは逆の過程から配位を生成することができる。その方法を厳密な制限ボルツマンマシン (Exact RBM) と呼ぶ。Exact RBM の結果を用いることで正答率の理論的上限値を求めることができる。正規分布近似は図 (3) であり、Exact RBM は図 (4) となる。

混合サンプルにおける配位 $\{\sigma\}$ の生成確率は、カノニカル分布を用いて

$$P\left(\{\sigma\}\right) = \frac{1}{N_{\mathrm{class}}}\sum_{j}^{N_{\mathrm{class}}} P\left(\{\sigma\};K_j\right) = \frac{1}{N_{\mathrm{class}}}\sum_{j}^{N_{\mathrm{class}}}\frac{\exp\left(-K_j H\left(\{\sigma\}\right)\right)}{Z\left(K_j\right)} \tag{0.0.9}$$

と表せる。ある配位が与えられた際、その配位が K_j である確率は

$$Q\left(\{\sigma\};j=K_j\right) = \frac{P\left(\{\sigma\};K_j\right)}{\sum_l P\left(\{\sigma\};K_l\right)} \tag{0.0.10}$$

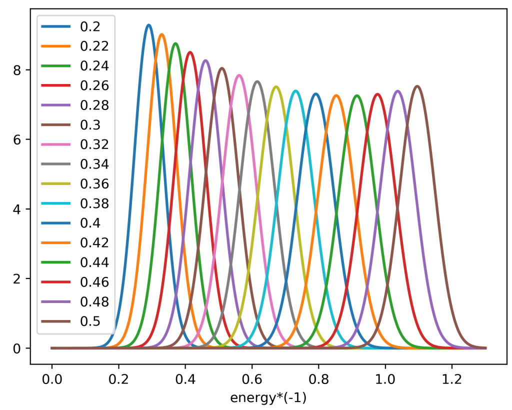

図 3: 正規分布近似

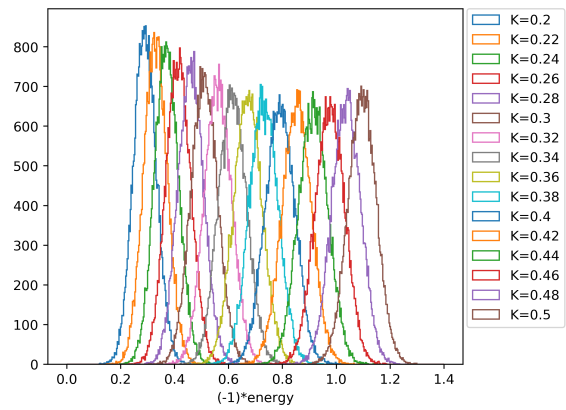

図 4: Exact RBM

と表る。したがってその配位の尤もらしい $K_{j\,\max}$ は

$$K_{j\,\max}\left(\{\sigma\}\right) = \arg\max_{j} Q\left(\{\sigma\}\,;j\right) \tag{0.0.11}$$

となる。最大正答率 $A\left(\{\sigma\}\right)$ は

$$A\left(\{\sigma\}\right) = Q\left(\{\sigma\}\,;K_{j\,\max}\right) \tag{0.0.12}$$

となる。よって正答率の理論的上限値は式 (0.0.12) のサンプル平均で表せ

$$A_{\max} = \frac{1}{N_{\text{class}}} \sum_{j}^{N_{\text{class}}} \sum_{\{\sigma\}} P\left(\{\sigma\}\,;K_j\right) Q\left(\{\sigma\}\,;K_{j\,\max}\right) \tag{0.0.13}$$

となる。正答率の理論的上限値は 43.6%であった。よって機械学習から得られた結果とかなり近いことがわかり、かなり良い精度で温度推定が行われていることがわかる。

配位はカノニカル分布に従っているので、機械が正答率の理論的上限値に近い値を出すためにはハミルトニアンを学ばなければならない。理論上限値と CNN の正答率を比較すると、概ね近い値を出していることから、CNN はハミルトニアンを認識していると考えられる。エネルギーのゆらぎすなわち比熱は相転移温度で特異性を持ち、この比熱の特異性を機械がどこかに情報を残しているはずである。CNN の分類器つまりソフトマックス関数に注目する。畳み込みの操作によって圧縮された配位 x とすると、パラメータを用いて確率分布を

$$q\left(K_j;x\right) = P(C_j|\mathbf{W},\mathbf{b},\mathbf{x}) = \underset{j}{\text{softmax}}(u_1,u_2,\ldots,u_{N_{\text{class}}}) \tag{0.0.14}$$

とする。混合サンプルの場合を考えると機械学習における誤差関数は、ある配位 σ において、対数尤度関数は

$$C_{i,\{\sigma\}} = -\log q\left(\{\sigma\}\,;K_i\right) \tag{0.0.15}$$

と表す。また式 (0.0.15) をコスト関数と言う。配位 σ を固定して i に関してのコスト関数の平均は確率 (0.0.10) を用いて

$$
\begin{aligned}
C_{\{\sigma\}} &= -\sum_i Q\left(\{\sigma\};K_i\right)\log q\left(\{\sigma\};K_i\right) \\
&= \sum_i Q\left(\{\sigma\};K_i\right)\log\frac{Q\left(\{\sigma\};K_i\right)}{q\left(\{\sigma\};K_i\right)} - \sum_i Q\left(\{\sigma\};K_i\right)\log Q\left(\{\sigma\};K_i\right)
\end{aligned}
\tag{0.0.16}
$$

である。また全サンプルの平均は式 (0.0.9) を用いて

$$
C = \sum_{\{\sigma\}} P\left(\{\sigma\}\right) C_{\{\sigma\}} \tag{0.0.17}
$$

とあらわせる。コスト関数 C を最小値するには $Q\left(\{\sigma\};K_i\right)$ を固定して $q_{\max}\left(\{\sigma\};K_i\right)$ を調整することになる。

式 (0.0.17) の最小値は

$$
C_{\min} = -\sum_{\{\sigma\}} P\left(\{\sigma\}\right)\sum_i Q\left(\{\sigma\};K_i\right)\log Q\left(\{\sigma\};K_i\right) \tag{0.0.18}
$$

となる。$C_{\min}$ は正規分布近似および Exact RBM から求めることができ計算することができる。正規分布近似における最小値は

$$
C_{\min} = 1.2697 \tag{0.0.19}
$$

であり Exact RBM おける最小値は

$$
C_{\min} = 1.2673 \tag{0.0.20}
$$

である。機械学習の結果は 1.274 なので、理論的な誤差関数の最小値に非常に近いことがわかる。つまり機械はソフトマックス関数をカノニカル分布を規格化した量 $Q\left(K_i;\{\sigma\}\right)$ に近くようにパラメータを定めていることになる。

機械が学習によってハミルトニアンを認識していることと、機械はソフトマックス関数をカノニカル分布を規格化した量に近くようにパラメータを定めていることから、ソフトマックス関数に入力される値 x は $x \propto E$ となると期待できる。よって

$$
\begin{aligned}
\exp\left(\omega_j x + b_j\right) R(E) &= \exp\left(-K_j E + W(K_j)\right) \\
\omega_j x + b_j + \log R(E) &= -K_j E + W(K_j)
\end{aligned}
\tag{0.0.21}
$$

である。$x = -a_1 E - a_0$、$\log R(E) = c_0 + c_1 E$ とすると

$$
\begin{aligned}
\omega_j &= \frac{K_j + c_1}{a_1} \\
b_j &= W(K_j) + \omega_j a_0 - c_0
\end{aligned}
\tag{0.0.22}
$$

となる。ω_j は K_j の 1 次式であり、$b_j - W(K_j)$ は K_j の 1 次式である。よって b_j の温度の 2 階微分は不定性がなくなる。b_j の温度の 2 階微分は比熱となる。

$$
-\frac{a_1^2(b_{j+1} - 2b_j + b_{j-1})}{(\omega_{j+1} - \omega_j)(\omega_j - \omega_{j-1})} = -\frac{\partial^2 W(K)}{\partial K^2} = C(K_j) \tag{0.0.23}
$$

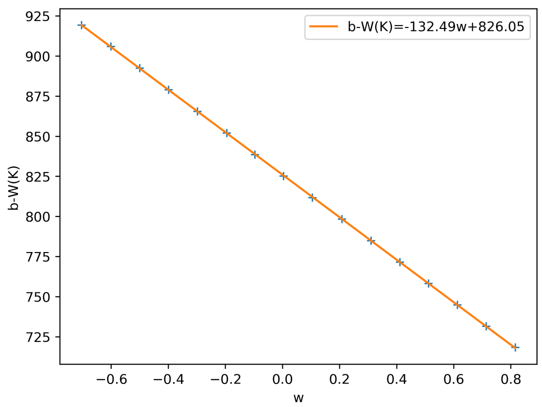

図 5: バイアス・自由エネルギーと重み

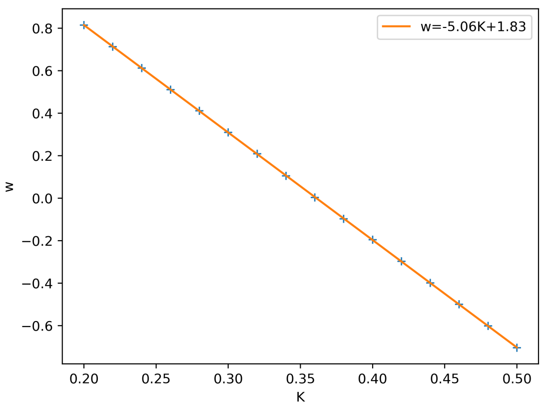

図 6: 重みと温度の関係

図 5 は、ω_j と K_j をプロットしたものである。また図 6 は $b_j - W(K_j)$ と K_j をプロットしたものである。これらから ω_j は K_j の 1 次式であり、$b_j - W(K_j)$ は K_j の 1 次式であることがわかる。図 7 はバイアスをプロットしたものであり、図 8 はバイアスを重みで 1 階微分を行なったものである。重みの 1 階微分では不定性が残るので、$K = 0.36$ の値が BDRG の結果と一致するように平行移動したのもを図 9 に表す。図 10 は、式 (0.0.23) をプロットしたものである。

ヘルムホルツの自由エネルギーを

$$\begin{aligned} F(K_j) &= -\frac{1}{K_j}\log Z(K_j) = \frac{1}{K_j}W(K_j) \\ &= E - \frac{S(K_j)}{K_j} \end{aligned} \tag{0.0.24}$$

とすると、

$$\begin{aligned} y_j &= \omega_j x + b_j \\ &= -\frac{K_j + c_1}{a_1}(a_1 E + a_0) + W(K_j) + \frac{K_j + c_1}{a_1}a_0 - c_0 \\ &= -K_j E + F(K_j) + \mathcal{O}(E^1) + \text{const} \\ &= -S(K_j) + \mathcal{O}(E^1) + \text{const} \end{aligned} \tag{0.0.25}$$

となる。図 11 は、式 (0.0.25) をプロットしたものであり、図 11 の包絡線はエントロピーを示している。

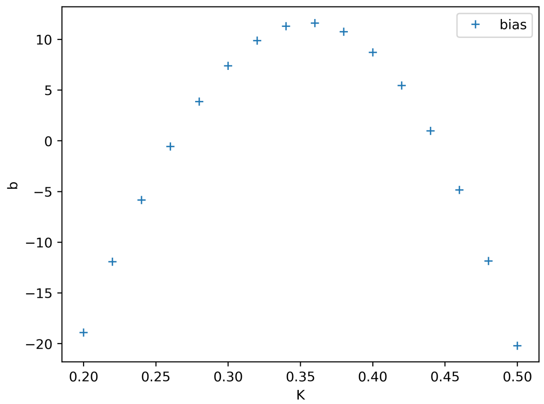

図 7: バイアス

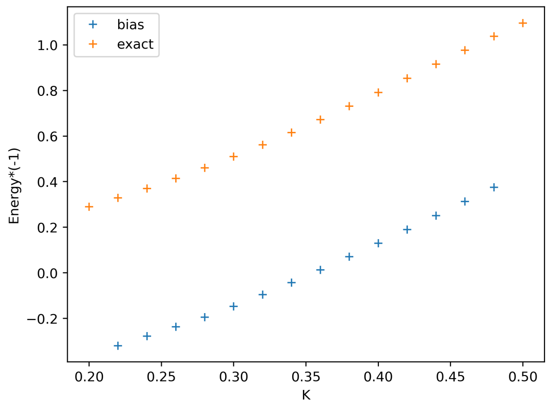

図 8: バイアスの 1 階差分

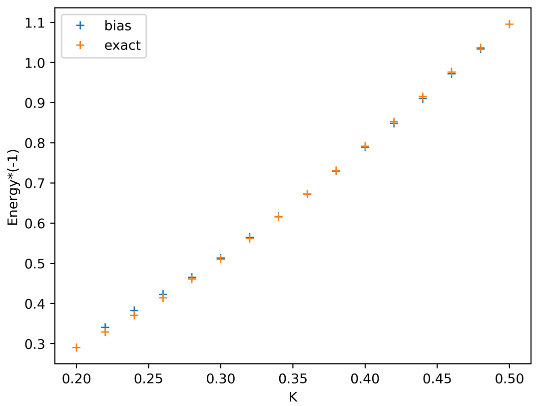

図 9: バイアスの 1 階差分を平行移動

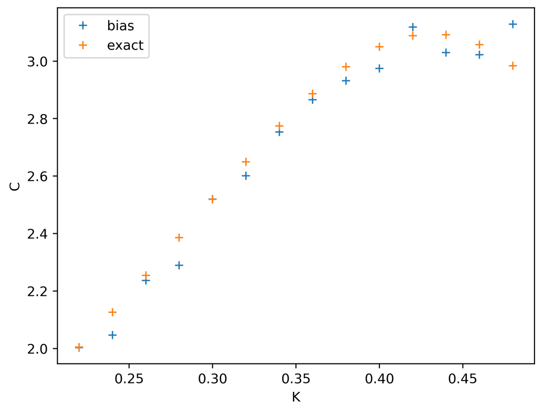

図 10: バイアスの 2 階差分

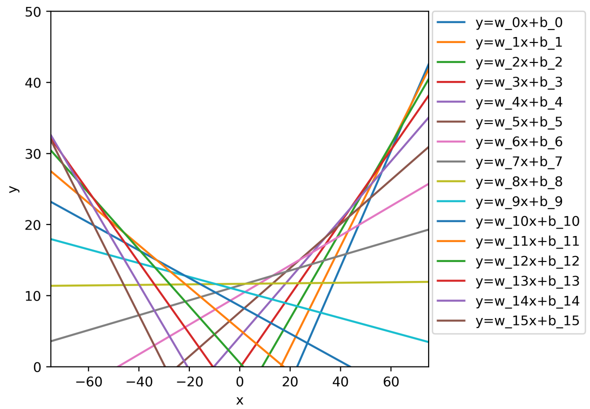

図 11: y と x の関係

平成３１年２月５日

学位論文審査報告書（甲）

１．学位論文題目（外国語の場合は和訳を付けること。）

統計系配位の深層学習による相転移温度推定

２．論文提出者　(1) 所　　属　数物科学　　　　　専攻

(2) 氏　　名　藤田　達大（ふじた　たつひろ）

３．審査結果の要旨（600～650字）

本論文は、統計系において温度を定めて生成した配位集合を深層学習の入力として生成温度をラベルとした教師有学習を行い、その結果として深層学習機械がいかに相転移を認識するかという問題について分析を行い、明確な結論を与えている。

生成温度を推定する機械を最適化するための条件を検討し、機械が配位のハミルトニアンを知ることが必要十分であることを示した。次に、最適化された機械パラメタの中で、最終段に使われるウェイトとバイアスの二つのパラメタが、統計系の物理量と特定の関係式を満たすことが必要十分であることを示した。上記の結論を１次元の長距離イジング模型と２次元の最近接イジング模型を例にとって検証した。機械が十分に最適化されていることをみるために、温度推定正答率についての理論的上限と最適化に用いるコスト関数（交差エントロピー）の理論的下限値を評価する方法を開発し、実際の機械が十分に最適化されていることを確認した。最適化された機械のパラメタが証明した等式を満たすことを示した。それは最終段のバイアスに統計系の自由エネルギーが温度の関数として刻まれるという想像を超えた結論である。その２階差分から比熱のピークを確認し、相転移温度推定が機能する事を示した。これは先行研究の結果を全否定しながら、深層学習が何を学び、何を記憶するかを明確に示したものであり、分野のマイルストーンとなるべき成果である。

本研究は共同研究ではあるが、理論解析、数値計算ともに本人が主導しており、博士の学位に値する。

４．審査結果　(1) 判　　定（いずれかに○印）　合　格　・　不合格

(2) 授与学位　博　士（　理学　）